虚数シフトのレゾルベントの多項式の実部をフィルタに用いた実対称定値一般固有値問題の中間固有対の解法

村上 弘（首都大学東京）

いま行列 A，B が実対称で，B は正定値の一般固有値問題 $A\,\mathbf{v} = \lambda B\,\mathbf{v}$ に対して，その固有対で固有値が指定区間 $[a, b]$ にあるものをフィルタ対角化法を用いて求める．固有値は実数であり，固有ベクトルもかならず実にとれるので実であるとする．

この一般固有値問題に対応するレゾルベントで ρ をシフトとするものを $\mathcal{R}(\rho) = (A - \rho B)^{-1} B$ とする．区間 $[a, b]$ が固有値分布の中央にある中間固有対を解く場合には，シフトを虚数にとるとレゾルベントは有界作用素となる．そこで対角化に用いるフィルタを，ある虚数 ρ をシフトとするレゾルベントの多項式の実部 $\mathcal{F} = \mathrm{Re}\,P(\mathcal{R}(\rho))$ とする．ここで $P(x)$ は x の複素係数のある n 次多項式である．このフィルタは有界な実作用素（実ベクトルから実ベクトルへの作用素）である．

いま任意の固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ に対して，レゾルベントの作用が $\mathcal{R}(\rho)\,\mathbf{v} = \frac{1}{\lambda-\rho}\,\mathbf{v}$ であることから，フィルタの固有ベクトルへの作用は $\mathcal{F}\,\mathbf{v} = f(\lambda)\,\mathbf{v}$ となる．ただし $f(\lambda) = \mathrm{Re}\,P\left(\frac{1}{\lambda-\rho}\right)$ である．よって $f(\lambda)$ は固有値が λ の固有ベクトルに対する伝達関数であり，λ の有界な実有理関数で，極は虚数 ρ とその複素共役 $\overline{\rho}$ だけで，どちらも n 位である．

シフト ρ と多項式 $P(x)$ の係数をすべて調整して伝達関数の特性をなるべく良くするには数値的最適化が必要になる（文献 [1] では，シフトを先に決めてから多項式のすべての係数を調整する場合を扱った）．しかし今回は伝達関数 $f(\lambda) = \mathrm{Re}\,P\left(\frac{1}{\lambda-\rho}\right)$ をチェビシェフ多項式を用いて表わされたある簡単な形の式の場合に制限することで，伝達関数の特性形状は悪化するが，数値的最適化の処理を省略して簡単な式の計算だけで設計を行なえるようにした [2].

レゾルベントの多項式の実部により実現できるフィルタは，複数のレゾルベントの線形結合を用いたものに比べて，伝達関数の形状特性は劣ったものとなる．しかし用いるレゾルベントが 1 つだけであることから，レゾルベントの作用の実現を与える連立 1 次方程式をたとえば係数が帯行列であれば行列分解を用いて解くとすれば，行列分解に費やす演算量が減り，必要な記憶量も減る．ベクトルの組に対するレゾルベントの n 次多項式 $\mathcal{F}$ の作用の計算には，レゾルベントの適用が n 回現れるが，行列分解を最初に 1 度だけ行なってその結果を保持すれば，毎回の連立 1 次方程式の組は前進消去と後退代入だけの比較的少ない計算量で解ける．

係数が帯行列の場合の実対称定値一般化固有値問題に対して,「レゾルベントの多項式の実部」を「チェビシェフ多項式を用いて表わされた形の式」に制限したフィルタを用いて数値実験を行ない，この方法がうまく機能することを確かめた.

計算法の詳細と性能の実測結果は，当日のポスターで発表する.

参考文献

[1] 村上弘: 一つのレゾルベントから構成されたフィルタを用いた実対称定値一般固有値問題に対するフィルタ対角化法の実験, **情報処理学会研究報告**, Vol.2015-HPC-149, No.7 (2015 年 6 月), pp.1–16.

[2] 村上弘: 固有値問題の解法に用いるレゾルベントの多項式型のフィルタの設計, **情報処理学会研究報告**, Vol.2016-HPC-153, No.38 (2016 年 3 月), pp.1–13.